

带间作用与超导转变温度*

曹天德

(西南师范大学物理系, 重庆 400715)

(2001 年 9 月 14 日收到 2001 年 10 月 22 日收到修改稿)

用格林函数方法研究 d-p 模型, 表明带间电子-电子作用 U_{dp} 导致超导并提升超导转变温度, 而在位电子-电子作用 U_d 降低超导转变温度. 由于带间作用, 正常态和超导态都可以有非费米液体行为.

关键词: 超导转变温度, 带间作用, 在位作用, 格林函数

PACC: 7420, 7100

1. 引 言

随着制造大块单晶的不断成功^[1,2], 高温超导体的许多性质已经探明, 这些性质受多方面的制约, 如掺杂会影响晶格常数、因而影响电子结构^[3], 存在 Van Hove 奇异性则可以提高临界温度处的比热跃变^[4], 对解释高 T_c 的起因也有利. 但弄清高温超导电性, 最重要的可能是找到这样一种作用机理, 既能解释电子/空穴配对原因, 又能说明高温超导体的正常态和超导态的非费米液体行为^[5], 所用模型力求简单, 但物理内涵应尽可能丰富.

Hubbard 模型, 尤其是单带 Hubbard 模型, 是人们研究的热点, 可用来解释高温超导体的许多性质; 过去得知, 对一维情形有非费米液体行为^[6], 近期有的工作表明, 在二维半填充下, 有非费米液体行为、有电子配对迹象^[7], 就电子配对机制而言, 我们的结果与此不同.

Perakis 提出, 近邻作用也可能导致局域电子配对和非费米液体行为^[8]. 比这更进一步, 我们将陆续报道 d-p 模型是能说明高温超导体一些主要性质的最简单模型. 由于电子间的强关联, 微扰论受到了许多质疑, 所以这里用格林函数运动方程方法, 采用 d-p 模型, 揭示了超导转变温度与带间电子-电子作用 U_{dp} 以及在位电子-电子作用 U_d 的不同关系, 并且表明, 由于带间作用, 对于适当的粒子填充, 正常态和超导态都有非费米液体行为.

2. d-p 模型与格林函数方法

在动量/波矢空间, d-p 模型的形式为

$$\begin{aligned} H = & \epsilon_d \sum_{k\sigma} d_{k\sigma}^+ d_{k\sigma} + \epsilon_p \sum_{k\sigma} p_{k\sigma}^+ p_{k\sigma} \\ & + \sum_{k\sigma} V_k (d_{k\sigma}^+ p_{k\sigma} + p_{k\sigma}^+ d_{k\sigma}) \\ & + \frac{U_d}{N} \sum_{k, k', q} d_{k+q, \uparrow}^+ d_{k, \uparrow} d_{k'-q, \downarrow}^+ d_{k', \downarrow} \\ & + \sum_{\substack{k, k', q \\ \sigma, \sigma'}} \frac{U(q)}{N} d_{k+q\sigma}^+ d_{k\sigma} p_{k'-q\sigma'}^+ p_{k'\sigma'}, \end{aligned} \quad (1)$$

其中 d^+ 和 p^+ 分别表示二维 CuO_2 平面上 Cu 位和 O 位的电子/空穴产生算符, 波矢的矢量符号略去. 考虑到实际情况, U_d 不能太大. 另外,

$$V_k = 2V [\cos(k_x a/2) + \cos(k_y b/2)],$$

$$U(q) = 2U_{dp} [\cos(q_x a/2) + \cos(q_y b/2)],$$

关于波矢反射对称, N 是单胞数, 一般地可取 $a \approx b$. 这里沿用 d 带和 p 带的说法, 因此 (1) 式最后一项称为带间作用.

在微扰情况下, 维克定理有效, 格林函数取对角形式, 算符配对收缩. 当电子间的有效作用强到微扰方法受到怀疑时, 我们假设算符配对, 但格林函数不限于对角形式. 于是定义

$$\begin{aligned} G_p(k, k', \sigma, \tau - \tau') &= -T_\tau p_{k\sigma}(\tau) p_{k'\sigma}^+(\tau'), \\ G_{dp}(k, k', \sigma, \tau - \tau') &= -T_\tau d_{k\sigma}(\tau) p_{k'\sigma}^+(\tau'), \\ F_p^+(k, \sigma, \tau - \tau') &= T_\tau p_{k\sigma}^+(\tau) p_{k\sigma}^+(\tau'), \\ F_{dp}^+(k, \sigma, \tau - \tau') &= T_\tau d_{k\sigma}^+(\tau) p_{k\sigma}^+(\tau'), \end{aligned}$$

* 国家自然科学基金(批准号: 10147207)资助的课题.

这里定义 F 与 F^+ 互为厄米共厄, 与 Abrikosov 函数有区别. 约定

$$\mathcal{G}(k, k', \sigma, \rho) \equiv \mathcal{G}(k, k', \sigma, \tau - \tau' = 0)$$

等等, 在导出格林函数的运动方程时引进

$$u(k', k, \sigma) = \sum_q U(q) G_{\text{dp}}^+(k' - q, k - q, \sigma, \rho) \mathcal{N},$$

$$u(\bar{k}, \bar{\sigma}) = \sum_q U(q) F_{\text{dp}}(-k + q, \bar{\sigma}, \rho) \mathcal{N},$$

$$\tilde{U}_d(q) = \sum_{k', \sigma'} U(q) G_d(k', k' - q, \sigma', \rho) \mathcal{N},$$

$$\tilde{U}_p(q) = \sum_{k', \sigma'} U(q) G_p(k', k' - q, \sigma', \rho) \mathcal{N},$$

再做傅氏变换, 得到四个相耦合的方程

$$\begin{aligned} & (-i\omega_n + \varepsilon_p) G_p(k, k', \sigma, i\omega_n) \\ &= -\delta_{kk'} - V_k G_{\text{dp}}(k, k', \sigma, i\omega_n) \\ &+ \sum_{k''} u(k'', k, \sigma) G_{\text{dp}}(k'', k', \sigma, i\omega_n) \\ &- u(\bar{k}, \bar{\sigma}) F_{\text{dp}}^+(\bar{k}, \bar{\sigma}, i\omega_n) \delta_{k, k'} \\ &- \sum_q \tilde{U}_d(q) G_p(k - q, k', \sigma, i\omega_n), \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} & (-i\omega_n + \varepsilon_d) G_d(k, k', \sigma, i\omega_n) \\ &= -V_k G_p(k, k', \sigma, i\omega_n) \\ &+ \frac{U_d}{N} \sum_q F_d(k - q, \sigma, \rho) F_{\text{dp}}^+(\bar{k}, \bar{\sigma}, i\omega_n) \delta_{k, k'} \\ &+ u(k, \sigma) F_p^+(\bar{k}, \bar{\sigma}, i\omega_n) \delta_{k, k'} \\ &+ \sum_{k''} u^+(k, k'', \sigma) G_p(k'', k', \sigma, i\omega_n) \\ &- \left[\frac{U_d}{N} \sum_{k'', q} G_d(k'', k'' - q, \bar{\sigma}, \rho) \right. \\ &\left. + \sum_q \tilde{U}_p(q) \right] G_{\text{dp}}(k - q, k', \sigma, i\omega_n), \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} & [i\omega_n + \varepsilon_p + \tilde{U}_d(0)] F_p^+(\bar{k}, \bar{\sigma}, i\omega_n) \\ &= -V_k F_{\text{dp}}^+(\bar{k}, \bar{\sigma}, i\omega_n) - v^+(k, \sigma) G_{\text{dp}}(k, \sigma, i\omega_n) \\ &+ u^+(\bar{k}, \bar{k}, \bar{\sigma}) F_{\text{dp}}^+(\bar{k}, \bar{\sigma}, i\omega_n), \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} & [i\omega_n + \varepsilon_d + U_d \sum_{k'} G_d(k', \bar{\sigma}, \rho)] \\ &+ \tilde{U}_p(0) F_{\text{dp}}^+(\bar{k}, \bar{\sigma}, i\omega_n) \\ &= -V_k F_p^+(\bar{k}, \bar{\sigma}, i\omega_n) \\ &+ \frac{U_d}{N} \sum_q F_d^+(-k - q, \sigma, \rho) G_{\text{dp}}(k, k, \sigma, i\omega_n) \\ &+ v^+(\bar{k}, \bar{\sigma}) G_p(k, k', \sigma, i\omega_n) \\ &+ u(\bar{k}, \bar{k}, \bar{\sigma}) F_p^+(\bar{k}, \bar{\sigma}, i\omega_n), \end{aligned} \quad (5)$$

这些方程需近似求解. 我们的原则是, 先略去相对小量, 必要时, 再从物理意义上考虑取舍.

在 $V_k \ll \varepsilon_p - \varepsilon_d$, $V_k \gg U_{\text{dp}}$, 以及相对大 U_d 等条

件下 (2)–(5) 式可以简化. 引进

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon}_d &= \varepsilon_d + U_d N_{\text{ds}}/N + \tilde{U}_p(0), \\ \tilde{\varepsilon}_p &= \varepsilon_p + \tilde{U}_d(0), \end{aligned}$$

这里 N_{ds} 表示 d 带自旋为 σ 的电子/空穴数, 略去小项后, 采用迭代法, 得到

$$\begin{aligned} & F_p^+(\bar{k}, \bar{\sigma}, i\omega_n) \\ &= -\frac{V_k v^+(\bar{k}, \bar{\sigma})}{(i\omega_n + \tilde{\varepsilon}_p)(i\omega_n + \tilde{\varepsilon}_d)} G_p(k, k, \sigma, i\omega_n) \\ &- \frac{v^+(k, \sigma)}{(i\omega_n + \tilde{\varepsilon}_p)} G_{\text{dp}}(k, k, \sigma, i\omega_n), \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} & F_{\text{dp}}^+(\bar{k}, \bar{\sigma}, i\omega_n) \\ &= \frac{v^+(\bar{k}, \bar{\sigma})}{(i\omega_n + \tilde{\varepsilon}_d)} G_p(k, k, \sigma, i\omega_n) \\ &+ \frac{U_d \sum_q F_d^+(-k - q, \sigma, \rho)}{(i\omega_n + \tilde{\varepsilon}_d)} G_{\text{dp}}(k, k, \sigma, i\omega_n), \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} & G_{\text{dp}}(k, k', \sigma, i\omega_n) \\ &= \frac{V_k}{i\omega_n - \tilde{\varepsilon}_d - |u(k, \sigma)|^2 (i\omega_n + \tilde{\varepsilon}_p)} G_p(k, k', \sigma, i\omega_n), \end{aligned} \quad (8)$$

$$G_p(k, k, \sigma, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_p - \sum(k, i\omega_n)}, \quad (9)$$

这里自能函数

$$\begin{aligned} \sum(k, i\omega_n) &= \tilde{U}_d(0) \mathcal{N} [1 - \tilde{U}_d(0) \sum_q E^{-1}(q, i\omega_n)] \\ &- |u(\bar{k}, \bar{\sigma})|^2 (i\omega_n + \tilde{\varepsilon}_d) \\ &+ V_k^2 (i\omega_n - \tilde{\varepsilon}_d). \end{aligned} \quad (10)$$

引进了

$$\begin{aligned} E(q, i\omega_n) &= i\omega_n - \varepsilon_p + |u(\bar{k}, \bar{\sigma})|^2 (i\omega_n + \tilde{\varepsilon}_d) \\ &- V_k^2 (i\omega_n - \tilde{\varepsilon}_d). \end{aligned} \quad (11)$$

以上结果看来是较精确的, 可用于讨论其他相关问题.

3. 非费米液体行为

非费米液体行为由自能中的第一项引起. 可以看出, 配对函数不影响讨论非费米液体行为, 因此略去, 写成形式

$$\begin{aligned} E^{-1}(q, i\omega_n) &= A_k [i\omega_n - \varepsilon^{(1)}(k)] \\ &+ B_k [i\omega_n - \varepsilon^{(2)}(k)]. \end{aligned} \quad (12)$$

这里引进

$$A_k = [\tilde{\varepsilon}_d - \varepsilon^{(1)}(k)] \mathcal{N} [\varepsilon^{(2)}(k) - \varepsilon^{(1)}(k)], \quad (13)$$

$$B_k = [\tilde{\epsilon}_d - \epsilon^{(2)}(k)][\epsilon^{(1)}(k) - \epsilon^{(2)}(k)], \quad (14)$$

$$\epsilon^{(1,2)}(k) = \frac{1}{2}[\epsilon_p + \tilde{\epsilon}_d \pm \sqrt{(\epsilon_p - \tilde{\epsilon}_d)^2 + 4V_k^2}], \quad (15)$$

根据(9)式,带间作用对单粒子激发能的影响可视作小量,元激发能可由(15)式确定,是p带和d带的重整化,自能只影响色散关系细节,对 $\epsilon^{(1,2)}(k)$ 的极值无影响.由(12)–(15)式不难看出, $E^{-1}(q, i\omega_n)$ 的主要贡献来自能带 $\epsilon^{(1)}(k)$ 的最低点和 $\epsilon^{(2)}(k)$ 的最高点,这些点在第一布里渊区形成一条曲线,在此处附近, $\epsilon^{(1)}(k)$ 和 $\epsilon^{(2)}(k)$ 都近乎于标准能带,类似于应用积分中值定理,在研究推迟格林函数时,对于求和

$$\sum_q' E^{-1}(q, \omega) = \sum_q E^{-1}(q, \omega) - E^{-1}(k, \omega),$$

可把 A_k 和 B_k 视为常数,而做二维截断积分,结果是在 $\epsilon^{(1)}(k)$ 和 $\epsilon^{(2)}(k)$ 的极值点,谱权重 $z \rightarrow 0$,同时 $\text{Im} \sum_{\text{ret}} \rightarrow 0$,如果有分布在此极值点(线)附近的粒子且影响物理行为,例如,费米能位于此极值点附近,则存在非费米液体行为.特别有意思的是,这种非费米液体行为对于有无粒子配对都是存在的.p带配对意味着超导态,因此正常态和超导态都有非费米液体行为.

4. 超导转变温度

由(6)–(7)式可以看出,带间电子配对是p带电子配对的充要条件,因此函数 F_{dp}^+ 是关键.考虑到 U_d 较大,d带电子配对函数 F_d^+ 的效果是小的,在超导转变温度 $T = T_c$ 处,可取

$$F_{\text{dp}}^+(\bar{k}, \bar{\sigma}, i\omega_n) = \frac{v^+(\bar{k}, \bar{\sigma})}{(i\omega_n + \tilde{\epsilon}_d)} G_p(k, k, \sigma, i\omega_n),$$

$$G_p(k, k, \sigma, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_p - V_k^2/(i\omega_n - \tilde{\epsilon}_d)},$$

因此,利用

$$F_{\text{dp}}^+(\bar{k}, \bar{\sigma}, \rho) = \frac{1}{k_B T} \sum_{i\omega_n} F_{\text{dp}}^+(\bar{k}, \bar{\sigma}, i\omega_n)$$

采用围道积分,得到当 $T = T_c$ 时关于 $v^+(k, \sigma)$ 的积分方程

$$v^+(k, \sigma) = \sum_q U(q) v^+(k + q, \sigma) \frac{n_F(\epsilon_{k+q}^{(1)}) - n_F(\epsilon_{k+q}^{(2)})}{\epsilon_{k+q}^{(2)} - \epsilon_{k+q}^{(1)}}, \quad (16)$$

其中 $\epsilon^{(1,2)}$ 由(15)式决定.由于 CuO_2 层的各向异性, $v^+(k, \sigma)$ 也依赖于方向. T_c 由此式确定.注意到 $\epsilon^{(2)} - \epsilon^{(1)}$ 弱依赖 $U_{\text{dp}}, U(q) \propto U_{\text{dp}}$,由(16)式可看出,当 U_{dp} 增大,要求 $n_F(\epsilon^{(1)}) - n_F(\epsilon^{(2)})$ 减小,则 T_c 需增大;另一方面,当 U_d 增大, $\epsilon^{(2)} - \epsilon^{(1)}$ 也增大,这会使 $n_F(\epsilon^{(1)}) - n_F(\epsilon^{(2)})$ 减小,但上式要求这个费米粒子数分布差值 $n_F(\epsilon^{(1)}) - n_F(\epsilon^{(2)})$ 增大,这必然要求 T_c 减小.这个结果说明,带间作用提升超导转变温度,而在位作用抑制超导.

5. 结果与讨论

以上的结果说明,带间作用可导致电子/空穴配对,其作用越强,超导转变温度越高.但在位电子-电子作用,不仅不能导致电子/空穴配对,而且降低超导转变温度.一般地说,带间作用强度与在位作用强度是有关联的,这决定了超导转变温度的高低,带间作用还可以使正常态和超导态出现非费米液体现象.如果费米能位于能带 $\epsilon^{(1,2)}(k)$ (不是d带或p带)的极点,则非费米液体现象出现在费米能位置,否则,会有不同的物理效应,这又能否说明有的高温超导体有费米面呢?由于带间作用可说明高温超导体的许多行为,这在另文中有所阐述,因此带间作用对高温超导可能是主要的.

[1] Ling C, Huang Y Z, Zhou F et al 2000 *Chin. Phys.* **9** 624
 [2] Xiong H, Che G C, Yao Y S et al 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1787 (in Chinese) 熊 翰、车广灿、姚玉书等 2001 物理学报 **50** 1787
 [3] Li Q, Pan H B, Zhu C G et al 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 2055 (in Chinese) 李 旗、潘海斌、祝传刚等 2000 物理学报 **49** 2055

[4] Wang Y G, Pang H G and Liu M 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 548 (in Chinese) 王勇刚、逢焱刚、刘 楣 2000 物理学报 **49** 548
 [5] Kampf A P 1994 *Phys. Rep.* **249** 219
 [6] Kawakami N and Yang S K 1991 *J. Phys. Cond. Mat.* **3** 5983
 [7] Huscroft C, Jarrell M, Maier Th et al 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 139
 [8] Perakis I E and Vanna C M 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 3467

Superconducting transition temperature with interband interaction^{*}

Cao Tian-De

(*Department of Physics , Southwest China Normal University , Chongqing 400715 , China*)

(Received 14 September 2001 ; revised manuscript received 22 October 2001)

Abstract

The d-p model is studied using Green functions. It is shown that the interband interaction U_{dp} can lead to superconductivity and raising the critical temperature, but the local electron-electron interaction U_d decreases the transition temperature. We also argue that the interband interaction could make both the normal states and superconducting states show non-Fermi-liquid behaviours.

Keywords : superconducting transition temperature , interband interaction , localized electron-electron interaction , Green function

PACC : 7420 , 7100

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10147207).